

Fibonacci 序列的统计属性和电子输运系数^{*}

刘小良^{1)2)†} 黄晓梅³⁾ 徐慧¹⁾ 任意¹⁾

1)(中南大学物理科学与技术学院,长沙 410083)

2)(中南大学冶金科学与工程学院,长沙 410083)

3)(长沙电力职业技术学院电力工程系,长沙 410131)

(2009 年 8 月 9 日收到;2009 年 11 月 2 日收到修改稿)

对按膨胀规律 $A \rightarrow AB$ 和 $B \rightarrow A$ 生成的 Fibonacci 序列,采用一维随机行走模型数值计算了序列的自相关函数以及自行定义的准标准偏差。利用 Hurst 分析法研究了序列的再标度范围函数及其 Hurst 指数,并将结果与一维随机二元序列进行了对比。发现这些统计量有奇特的准周期振荡行为以及小于 0.5 的 Hurst 指数,直接论证了 Fibonacci 序列具有关联、标度不变及自相似等性质。从 Anderson 紧束缚模型出发,采用传输矩阵方法研究了 Fibonacci 序列的电子输运特性,讨论了输运系数对能量及其序列长度的依赖关系。研究表明,随着序列长度的增加具有好的透射性的电子态数量有所减少,但相对于随机序列而言,共振能态可以在更长的序列中存在,进一步证明了 Fibonacci 序列中存在较强的长程关联行为。

关键词: Fibonacci 序列, 统计属性, 电子输运系数

PACC: 7210B, 0250

续性^[13]。

Fibonacci 序列的结构特性及电子能谱特性与其统计特性密不可分,对其统计属性的描述已有一些报道^[14,15]。本文借助一维随机行走模型^[16]系统地研究了与其统计属性相关的一些物理量,如自相关函数 $C(i)$ 、再标度范围函数 (rescaled range function) $R(n)$ 、行走者位移的标准偏差 $S(n)$ 以及我们自行定义的准标准偏差等,根据这些统计量可以直接证明系统的关联性、自相似性以及标度不变性等特征。Fibonacci 序列的独特结构同时也导致了其特有的电子输运性质,我们曾经利用重正化群方法^[17]对其输运性质进行了研究,而传输矩阵方法^[18-21]也是一种研究电荷输运的常用方法。本文着眼于输运系数的能量依赖和序列长度依赖,利用传统的传输矩阵方法结合散射理论,研究系统的透射谱随系统长度的变化规律。

2. Fibonacci 序列模型

用 A, B 分别代表两种类型的格点,按照膨胀规

* 湖南省自然科学基金(批准号: 08JJ3005)、中国博士后科学基金(批准号: 20080431025)、中南大学博士后科学基金(批准号: 20071025)和湖南师范大学低维量子结构与调控教育部重点实验室基金(批准号: QSPC0905)资助的课题。

† E-mail: xlliucs@ sina. com

律^[5] $A \rightarrow AB$ 和 $B \rightarrow A$ 可构建出具有如下结构形式的 Fibonacci 序列: A , AB , ABA , $ABAAB$, $ABAABABA$, \dots . 该序列也可由递推关系 $S_{m+1} = \{S_m | S_{m-1}\}$ 生成, 其中 m 称为 Fibonacci 代, $m \geq 1$. 将第 m 代序列的格点数记为 F_m , 习惯上称为 Fibonacci 数, 遵循递推关系 $F_{m+1} = F_m + F_{m-1}$, 初始条件为 $F_0 = 1, F_1 = 1$.

只考虑最近邻格点的相互作用, Fibonacci 序列的一维单电子紧束缚哈密顿量表示为^[22-24]

$$H = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i=1}^N t(|i\rangle\langle i+1| + |i\rangle\langle i-1|), \quad (1)$$

其中 $|i\rangle$ 为 Wannier 表象中的基函数; N 为系统的格点数, 就 Fibonacci 序列而言, $N = F_m$; 在位格点能量 ε_i 可取 ε_A 和 ε_B 两个值, 分别对应于 A 型和 B 型格点; t 是跳跃积分. 为使问题简化, 我们已经将最近邻格点之间的跳跃积分取为相同, 而不考虑相邻格点的类型.

3. Fibonacci 序列的统计性质

3.1. 自相关函数及净位移的标准偏差

采用传统的一维行走模型^[16], 行走者在每一次行走中要么上行 ($u(i) = +1$), 要么下行 ($u(i) = -1$). 对于随机行走, 每一步的方向独立于先前的行走, 而对于关联的行走, 每一步的方向则依赖于行走者的历史. 一个 Fibonacci 行走可以通过以下的规则定义: 如果格点 i 是 A 型格点, 则称为上行; 如果格点 i 是 B 型格点, 则称为下行.

为了反映序列在不同格点的取值之间的相关程度, 考察其自相关函数

$$C(i) = \overline{u(i+i_0)u(i_0)} - [\overline{u(i_0)}]^2. \quad (2)$$

这里上划线表示对 i_0 遍取序列中所有格点的平均, 考虑序列长度的有限性, 约定 $1 \leq i_0 \leq N-i$. 图 1 为 Fibonacci 序列的自相关函数, 而在图 2 中我们给出

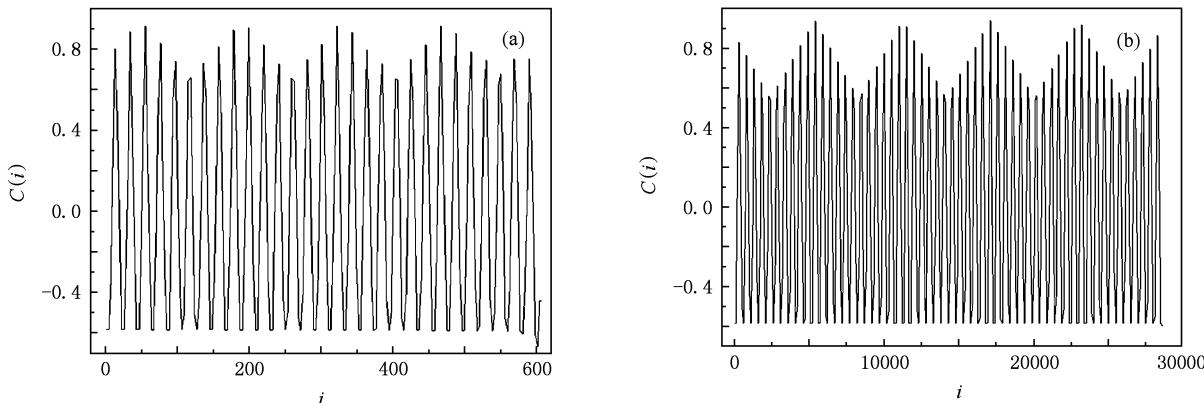


图 1 不同长度的 Fibonacci 序列的自相关函数 $C(i)$ 随格点 i 的变化 (a) $m = 14, F_m = 610$; (b) $m = 22, F_m = 28657$

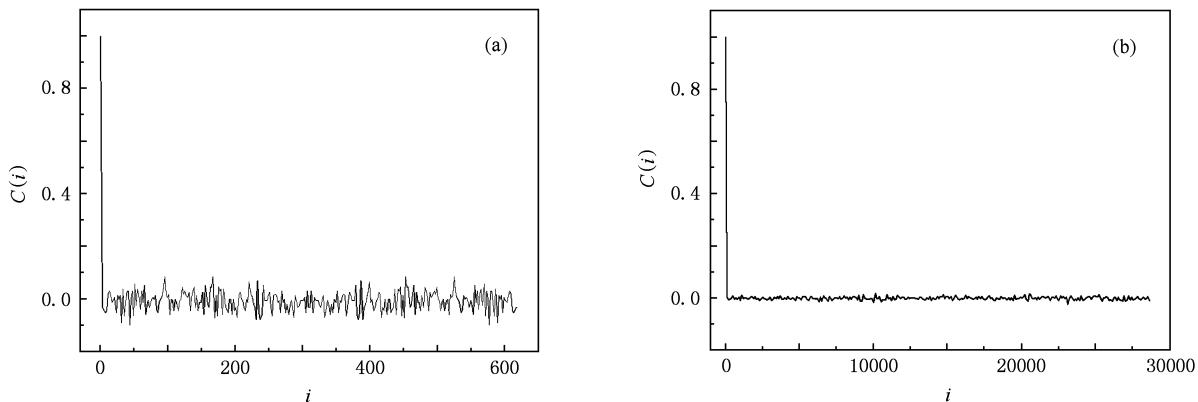
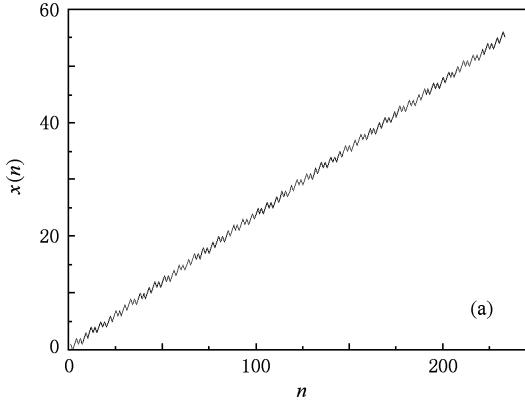


图 2 不同长度的一维随机二元序列中自相关函数 $C(i)$ 随格点 i 的变化 (a) $N = 610$, (b) $N = 28657$

了相应长度的一维随机二元序列的自相关函数以供比较.

一维随机序列的关联函数应该具有 $C(i) \propto \delta_{i0}$ 的形式, 从图 2 中我们证实了这一结论. 图 1 给出了两种不同长度的 Fibonacci 序列的自相关函数, 容易看出系统具有完全不同于随机系统的关联属性, 其关联函数表现出对格点的明显依赖, 且随格点的变化而振荡. 这种依赖关系似乎存在着一定的周期特性, 序列长为 28657 系统的 $C(i)$ 曲线几乎是复制了序列长为 610 系统的曲线, 两者的区别只是前者呈现出了一些与能谱分化相联系的额外



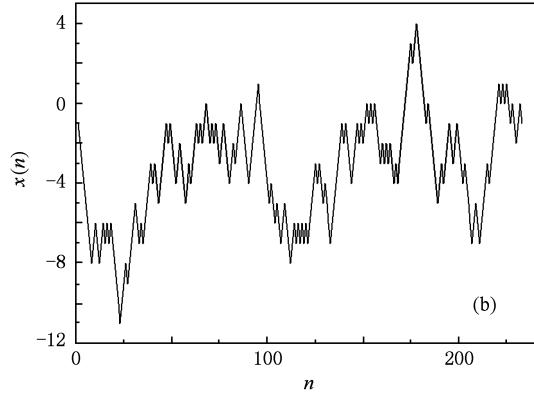
(a)

特征. 不同长度 Fibonacci 序列关联函数的相似性推测是源于 Fibonacci 序列的自相似性, 这种自相似性意味着当采用某些适当的比例从一个序列变到另一个序列时, 系统具有收缩或膨胀的规律.

定义行走者经过 n 步后的净位移 $x(n)$ 为每一步行走的位移 $u(i)$ 之和, 即

$$x(n) = \sum_{i=1}^n u(i). \quad (3)$$

图 3 给出了序列长同为 233 的 Fibonacci 序列和一维随机二元序列的净位移.



(b)

图 3 净位移 $x(n)$ 随行走步数 n 的变化关系 (a) Fibonacci 序列, $m = 12, F_m = 233$; (b) 一维随机二元序列, $N = 233$

由 Fibonacci 序列的结构特点可知, 序列中 A 型格点与 B 型格点的比例为 F_{m-1}/F_{m-2} , 当 $m \rightarrow \infty$, 这一比例趋向于 1.618, 满足黄金分割, 因此代表上行的 A 型格点数量较多, 在上述约定之下, 其净位移自然随步数 n 的增加而增加(见图 3(a)). 而随机二元序列的随机性在图 3(b) 中得到了体现, 我们给出序列中两种格点的比例为 1:1, 故其上行和下行格点的总量相等.

为描述格点取值的离散程度, 分析净位移的标准偏差 $S(n)$,

$$S(n) = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n [u(i) - \bar{u}_n]^2}, \quad (4)$$

其中 \bar{u}_n 为 n 步行走后的平均净位移, 即

$$\begin{aligned} \bar{u}_n &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n u(i) \\ &= \frac{x(n)}{n}. \end{aligned}$$

图 4 给出了净位移的标准偏差 $S(n)$ 的函数曲线. 对于 Fibonacci 序列, 其标准偏差呈现大约以 0.9717 为中心的振荡行为, 随着 n 的增加振荡逐渐

衰减. 对于随机二元序列, 其标准偏差在开始时存在比较剧烈的无规振荡, 而随着 n 的增加, 振荡显著减弱并以 1.0000 为渐近线, 考虑到我们所选择的随机序列中两种格点的比例为 1:1, 在一段比较长的序列中, 其平均净位移 \bar{u}_n 趋向于零, 由(4)式可知, $S(n)$ 自然趋向于 1.

我们在数值计算中发现, 如果定义

$$\sigma^2(n) = [\Delta x(n)]^2 - [\overline{\Delta x(n)}]^2, \quad (5)$$

且对 i_0 求平均时约定 $1 \leq i_0 \leq N-n$, 则 $\sigma(n)$ 似乎能很好地表征 Fibonacci 序列的标度性质. 这里

$$\Delta x(n) = x(i_0 + n) - x(i_0).$$

鉴于 $\sigma(n)$ 与标准偏差存在一定程度的相似性, 本文中将其命名为准标准偏差.

我们数值计算了序列长从 233 到 46368 的 4 种 Fibonacci 序列的 $\sigma(n)$, 结果如图 5 所示. 从图 5 可以看出, $\sigma(n)$ 随 n 的变化呈现出有趣的振荡行为, 振荡幅度约在区间 $[0, 1]$ 内, 这种变化有明显的类周期性, 可以形象地反映 Fibonacci 序列的标度性质. 如图 5(c) 和 (d) 所示, 当序列长增大为 28657 或 46368 时, 我们对系统采用了新的标度, 结果显示,

在新的标度下 $\sigma(n)$ 的振荡行为除增加了一些新特征外几乎是对图 5(a) 和 (b) 的复制, 这种标度

的不变性同时也是 Fibonacci 序列的自相似性的体现.

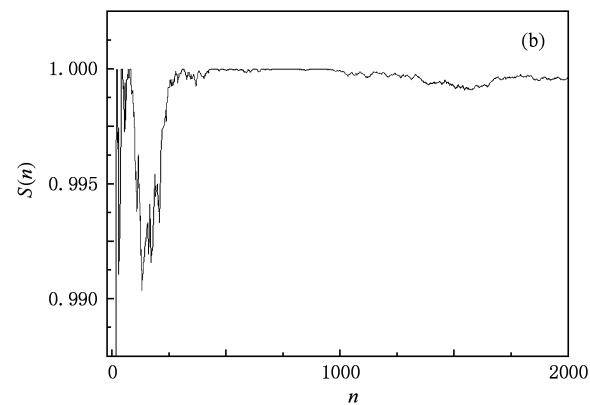
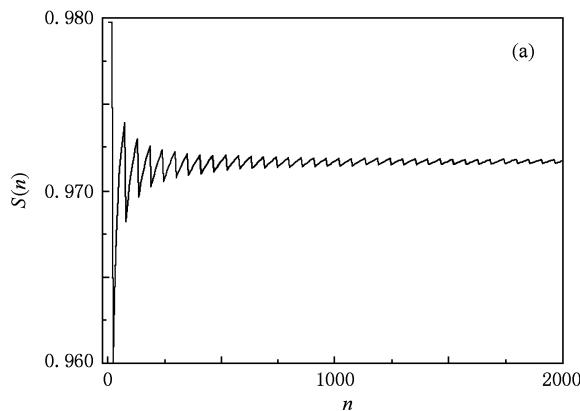


图 4 净位移标准偏差 $S(n)$ 随行走步数 n 的变化 (a) Fibonacci 序列,(b) 随机二元序列

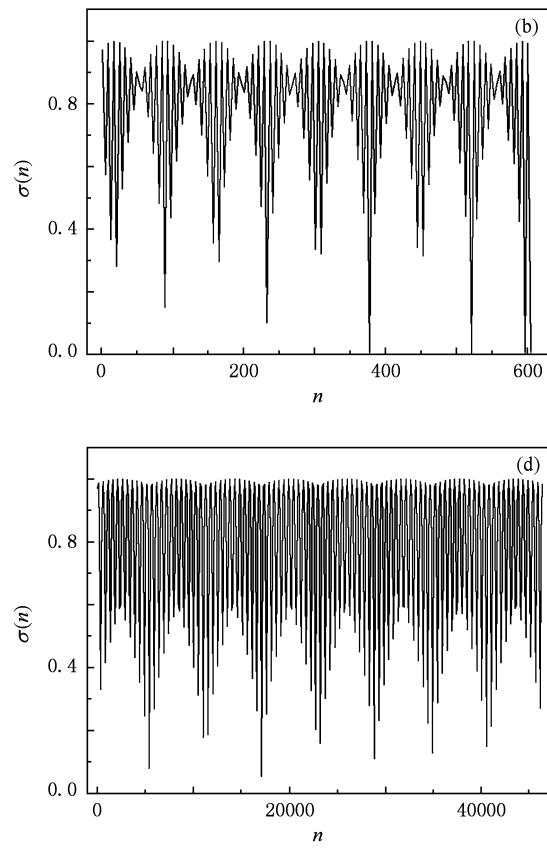
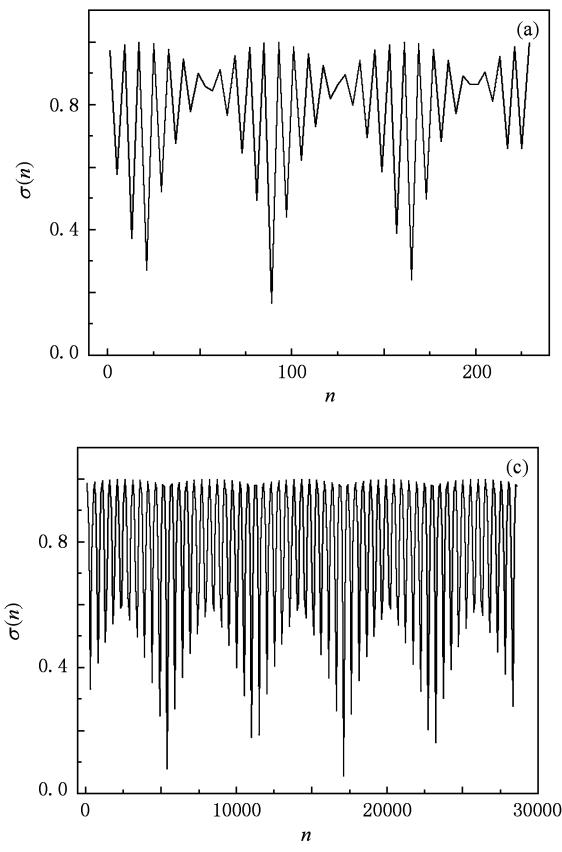


图 5 不同序列长度下, Fibonacci 序列的准标准偏差 $\sigma(n)$ 随行走步数 n 的变化 (a) $m = 12, F_m = 233$; (b) $m = 14, F_m = 610$; (c) $m = 22, F_m = 28657$; (d) $m = 23, F_m = 46368$

3.2. 再标度范围函数及 Hurst 指数

描述一维系统统计属性的另外一个重要概念就是由 Hurst 等^[25]首先引入的再标度范围函数, 这是一个更为有效的显示长程关联方法.

首先定义一个再标度变量

$$\begin{aligned} X(k, n) &= \sum_{i=1}^k [u(i) - \bar{u}_n] \\ &= x(k) - \frac{k}{n}x(n), \end{aligned} \quad (6)$$

其中 $1 \leq n \leq N, 1 \leq k \leq n$.

一个长度为 n 的一次行走的范围 $G(n)$ 可定

义为

$$G(n) = \max[X(k, n)] - \min[X(k, n)]. \quad (7)$$

这样,再标度的范围函数 $R(n)$ 则为

$$R(n) = G(n)/S(n), \quad (8)$$

其中 $S(n)$ 是由(4)式确定的标准偏差.

图 6 给出了 Fibonacci 序列的再标度范围函数 $R(n)$, 作为对照, 图中同时还给出了随机二元序列的 $R(n)$, 为便于进行系统的 Hurst 指数分析, 我们对数据进行了对数处理.

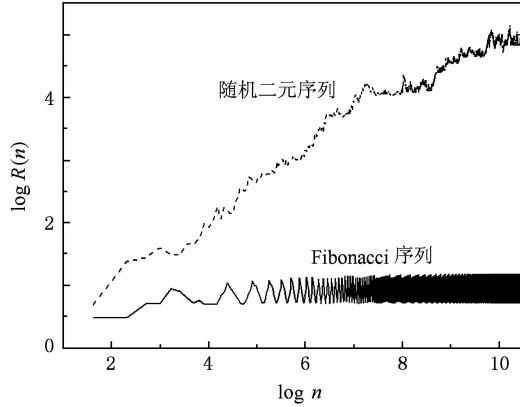


图 6 Fibonacci 序列和随机二元序列的再标度范围函数 $R(n)$ 随 n 的变化

在 Hurst 的分析中^[25], 将 $R(n)$ 和 n 的关系拟合为 $R(n) \propto n^H$ 形式, 称 H 为 Hurst 指数, 它具有更为有效地描述系统关联属性的功能. Hurst 等指出: 对应于非关联的随机系统, $H = 0.5$; 当 $H < 0.5$ 时, 表明系统会呈现一些关联行为; 而当 $H > 0.5$ 时, 系统会呈现出反关联行为. 从图 6 可以明显看出, 随机二元序列的再标度范围函数只是在 $H = 0.5$ 的直线附近上下波动, 用最小二乘法拟合可得 Hurst 指数 $H = 0.5$, 这符合对随机系统的一般性结论. Fibonacci 序列具有相对剧烈且明显小于随机二元序列的再标度范围函数 $R(n)$, 其 Hurst 指数 $H < 0.5$, 说明 Fibonacci 序列具有特别的关联属性, 已经有理论提出该系统是具有弹道行为的强烈关联体系, 我们的计算印证了这一观点.

4. 输运系数

我们曾在最近的研究中采用重正化群方法^[17]计算了 Fibonacci 序列中不同本征能态的输运系数, 这里我们直接利用传统的传输矩阵方法^[18-20]结合散射理论来研究该序列的输运系数对能量和序列

长度的依赖关系.

将系统的波函数在 Wannier 表象中的基函数上展开 $\psi = \sum_i a_i |i\rangle$, 其中 $|a_i|^2$ 代表在格点 i 处发现电子的概率. 系统哈密顿量(1)式所对应的薛定谔方程可写成

$$Ea_i = \varepsilon_i a_i + ta_{i+1} + ta_{i-1}. \quad (9)$$

利用传输矩阵, 可得到如下的迭代公式:

$$\begin{bmatrix} a_{i+1} \\ a_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (E - \varepsilon_i)/t & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_i \\ a_{i-1} \end{bmatrix} \\ \equiv M_i \begin{bmatrix} a_i \\ a_{i-1} \end{bmatrix}. \quad (10)$$

连续应用传输矩阵, 可获得

$$\begin{bmatrix} a_{N+1} \\ a_N \end{bmatrix} = M_N M_{N-1} \cdots M_2 M_1 \begin{bmatrix} a_1 \\ a_0 \end{bmatrix} \\ \equiv M \begin{bmatrix} a_1 \\ a_0 \end{bmatrix}. \quad (11)$$

考虑将上述 Fibonacci 序列连入两半无限长的电极, 电极的能量被调节至共振能量, 即 $\varepsilon_e = \varepsilon_A$, 而跳跃积分设置为 $t_e = t$, 可以得出系统的输运系数为

$$T_N(E) = [4 - G^2(E)]/[2 + \sum_{i,j=1,2} M_{ij}^2 + G(E)(M_{11} - M_{22})(M_{12} - M_{21}) - G^2(E)(M_{12}M_{21} + 1)], \quad (12)$$

其中 M_{ij} 是传输矩阵 M 的矩阵元,

$$G^2(E) = (E - \varepsilon_A)/t.$$

本文中我们参照文献[14, 15, 26]在处理聚 G-聚 C 型 Fibonacci 人工 DNA 序列的参数设置方式, 取格点间跳跃积分 $t = 1$ eV, 并取格点能量为 $\varepsilon_A = 7.75$ eV, $\varepsilon_B = 8.87$ eV.

为供对照, 图 7 给出了格点数分别为 60 和 180 的随机二元序列的输运系数 $T_N(E)$ 随本征能量 E 的变化关系. 从图 7 可以看出, 每一共振峰对应着具有较好输运性能的一个能态, 当序列长增加时, 共振峰数量显著减少且峰值高度迅速降低, 当序列长增加到 240 时, 其输运系数几乎可以忽略. 随机系统的这一现象容易借助无序系统中电子态的局域化理论予以解释.

图 8 给出了格点数分别为 60, 180, 600 的 Fibonacci 序列的输运系数 $T_N(E)$. 从图 8 可以看出, 系统在符合能量的子带、亚子带分布的某些分立能量值下具有较大的输运系数, 出现了一定量

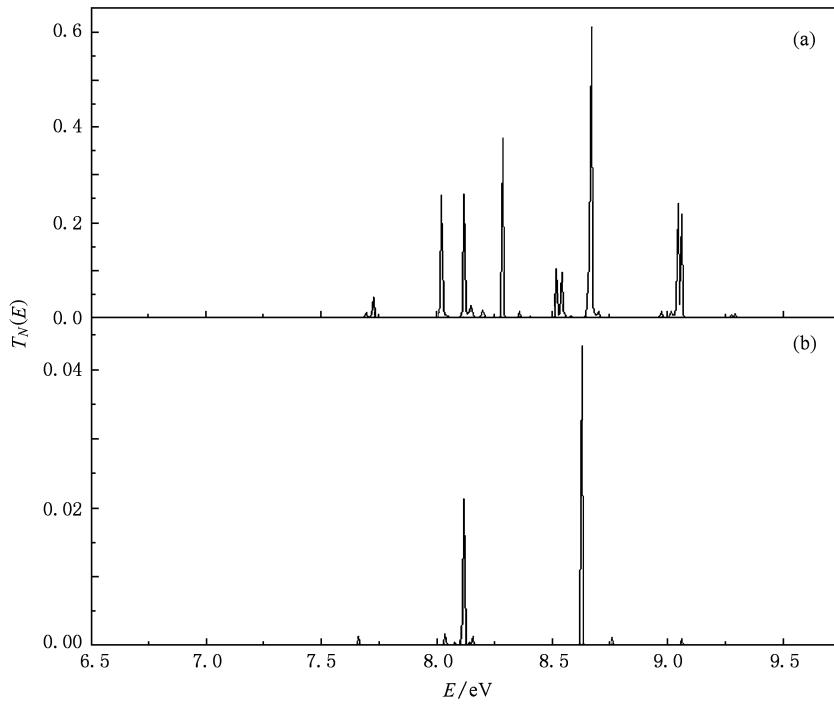


图 7 随机二元序列的输运系数 $T_N(E)$ 随本征能量 E 的变化 (a) $N = 60$, (b) $N = 180$

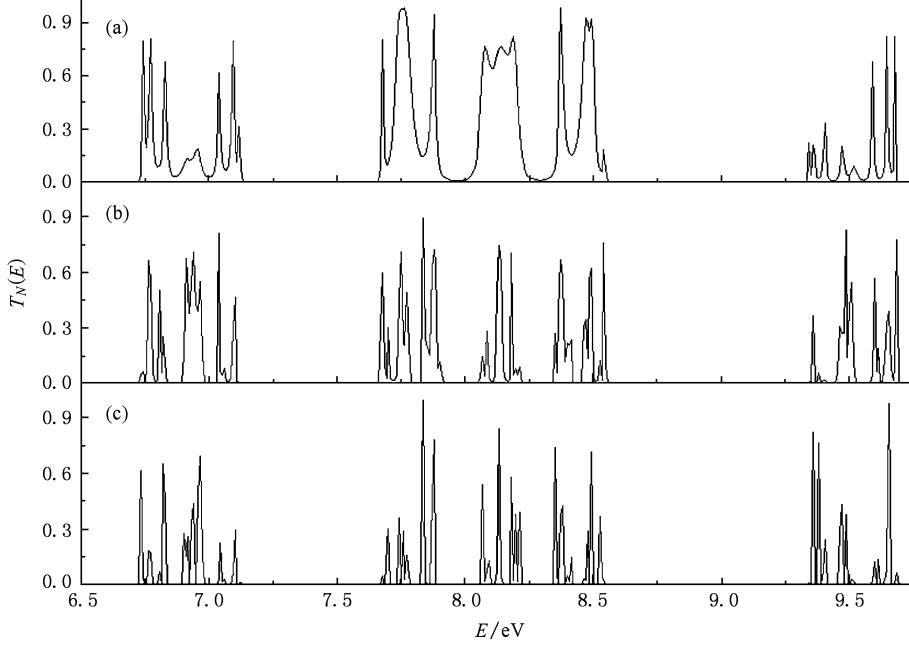


图 8 不同长度下 Fibonacci 序列的输运系数 $T_N(E)$ 随本征能量 E 的变化 (a) $N = 60$, (b) $N = 180$, (c) $N = 600$

的共振峰,这些共振能态在系统中呈现出良好的透射性. 当序列长度增加时,能谱进一步细化,具有好的透射性的能态越来越少,有些具有高透射性的共振峰位置保持不变,但也有新的峰出现,意味着少数能态比在短序列中具有更好的透射性能.

对比随机二元序列的输运系数可以看出,Fibonacci 序列具有更多的共振能态、更大的输运系数,而且这些共振能态能存活于更长的系统中. 这一结果可以作为 Fibonacci 序列中存在关联的直接证据,因为关联系统中是允许扩展态存在的,以上

所提到的具有好的输运性能的能态实质上就是扩展态.

根据输运系数, 可定义系统的 Lyapunov 指数

$$\gamma_N(E) = \frac{1}{2N} \ln [T_N(E)]. \quad (13)$$

这一参量常被用来表征系统的标度性质.

图 9 中给出了不同长度下随机二元序列和 Fibonacci 序列的 Lyapunov 指数 $\gamma_N(E)$. 从图 9 可以

发现: 对于随机二元序列(图 9(a)), 当序列长度增大时, 其 Lyapunov 指数变化明显, 意味着随机序列不具备标度不变性. 对于 Fibonacci 序列(图 9(b)), 容易看出, 当序列长度从格点数 60 增大到 120, 继而增大到 240 时, $\gamma_N(E)$ 曲线上的包块的位置和形状几乎完全一样. 据此, 我们可以判断 Fibonacci 序列具有标度不变性和自相似性, 这和由统计方法得到的结论一致.

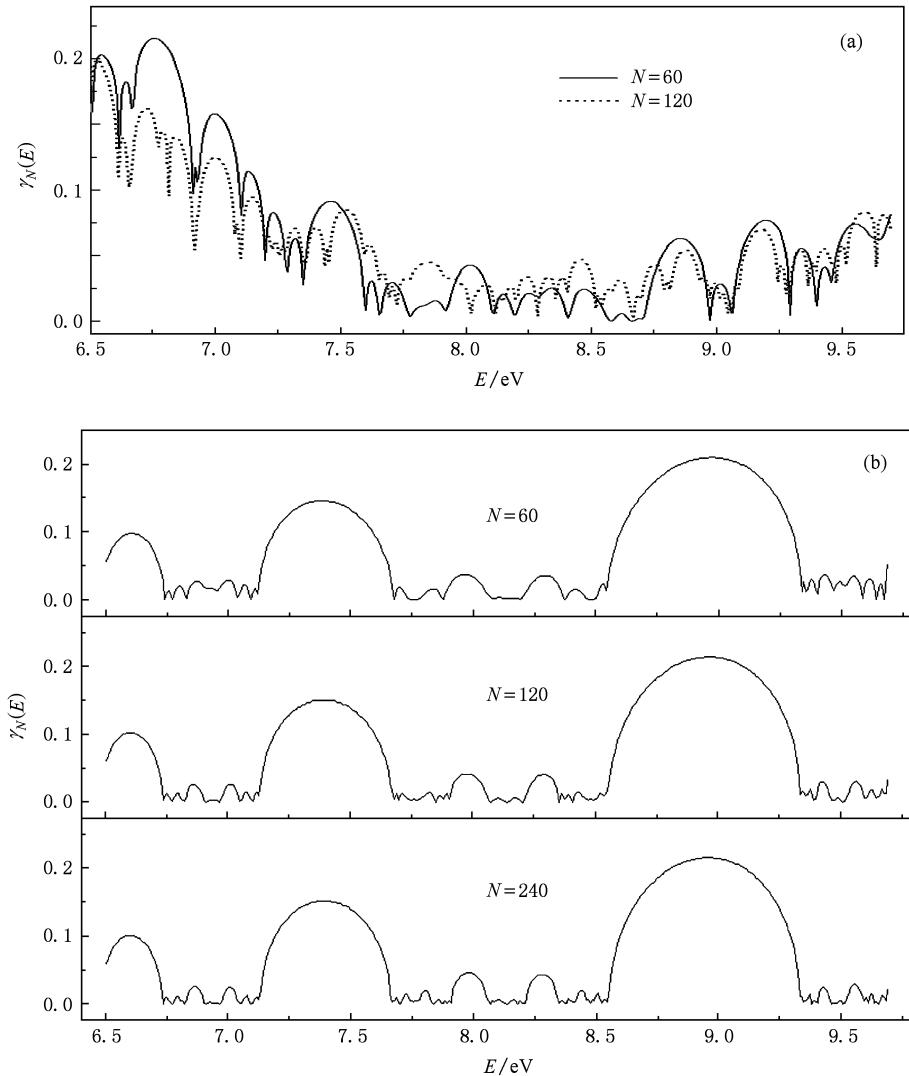


图 9 Lyapunov 指数 $\gamma_N(E)$ 随能量 E 的变化 (a) 随机二元序列, (b) Fibonacci 序列

5. 结 论

本文采用一维随机行走模型, 利用 Hurst 分析法研究了 Fibonacci 序列的再标度范围函数及其 Hurst 指数. 从 Anderson 紧束缚模型出发, 采用传输

矩阵方法研究了 Fibonacci 序列的电子输运特性. 研究发现: Fibonacci 序列具有非 δ 型的相关函数, 其 Hurst 指数小于 0.5, 说明该系统具有内在的关联属性. Fibonacci 序列的关联函数、净位移的标准偏差以及再标度范围函数等统计物理量均出现奇特的振荡行为, 可以认为是系统准周期性、标度不变性

及自相似性的直接证明. Fibonacci 序列中有些能态具有好的透射性, 系统对这些电子态是透明的, 随着序列长度的增加, 共振峰的数量、高度及位置均

有所改变, 具有好的透射性的电子态数量虽有所减少, 但能在相对较长的序列中维持其存在, 这是系统中存在关联的必然结果.

-
- [1] Randic M, Morales D A, Araujo O 1996 *J. Math. Chem.* **20** 79
 - [2] Jean R V 1984 *Mathematical Approach to Patterns and Form in Plant Growth* (New York: Wiley Press)
 - [3] He L X, Li X Z, Zhang Z 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 1116
 - [4] Merlin R, Bajima K, Charke R 1985 *Phys. Rev. Lett.* **55** 1768
 - [5] Yan X H, Yan J R, Zhong J X, You J Q 1992 *Acta Phys. Sin.* **41** 1652 (in Chinese) [颜晓红、颜家壬、钟建新、游建强 1992 物理学报 **41** 1652]
 - [6] Huang X Q, Gong C D 1998 *Phys. Rev. B* **58** 739
 - [7] Li P F, Yan X H, Wang R Z 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2139 (in Chinese) [李鹏飞、颜晓红、王如志 2002 物理学报 **51** 2139]
 - [8] Gao Y J, Yang X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3620 (in Chinese) [曹永军、杨旭 2008 物理学报 **57** 3620]
 - [9] Enrique M, Francisco D A 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 2957
 - [10] Atsushi N, Shinkichi H 2007 *Phys. Rev. B* **76** 235113
 - [11] Kohmoto M, Banavar J R 1986 *Phys. Rev. B* **34** 563
 - [12] Oh G Y, Choi H Y 1996 *Phys. Rev. B* **54** 6043
 - [13] You J Q, Zhang L D, Yang Q B 1997 *Phys. Rev. B* **55** 1314
 - [14] Stephan R, Dominique B, Enrique M, Kats E 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 228101
 - [15] Albuquerque E L, Vasconcelos M S, Lyra M L, de Moura F A B F 2005 *Phys. Rev. E* **71** 021910
 - [16] Peng C K, Buldyrev S V, Goldberger A L 1992 *Nature* **356** 168
 - [17] Liu X L, Xu H, Deng C S, Ma S S 2006 *Physica B* **383** 226
 - [18] Roche S 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 108101
 - [19] Carpena P, Bernaola-Galvan P, Ivanov P C 2002 *Nature* **418** 955
 - [20] Kramer B, MacKinnon A 1993 *Rep. Prog. Phys.* **56** 1469
 - [21] Meng X L, Gao X T, Qu Z, Kang D W, Liu D S, Xie S J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5316 (in Chinese) [孟宪兰、高绪团、渠朕、康大伟、刘德胜、解士杰 2008 物理学报 **57** 5316]
 - [22] Liu X L, Xu H, Deng C S, Ma S S 2007 *Physica B* **392** 107
 - [23] Liu X L, Xu H, Li Y F, Li M J 2008 *Chin. J. Comp. Phys.* **25** 358 (in Chinese) [刘小良、徐慧、李燕峰、李明君 2008 计算物理 **25** 358]
 - [24] Zhang W, Ulloa S E 2006 *Phys. Rev. B* **74** 115304
 - [25] Hurst H E, Black R, Sinaika Y M 1965 *Long-Term Storage in Reservoir: An Experimental Study* (London: Constable)
 - [26] Guo A M, Xiong S J 2009 *Phys. Rev. B* **80** 035115

The statistical properties and electronic transfer coefficients of Fibonacci sequence^{*}

Liu Xiao-Liang^{1)2)†} Huang Xiao-Mei³⁾ Xu Hui¹⁾ Ren Yi¹⁾

1) (School of Physics Science and Technology, Central South University, Changsha 410083, China)

2) (School of Metallurgical Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, China)

3) (Department of Electric Power Engineering, Changsha Electric Power Technology College, Changsha 410131, China)

(Received 9 August 2009; revised manuscript received 2 November 2009)

Abstract

For the Fibonacci sequence constructed by following the inflation rule A→AB and B→A, using the one-dimensional random walk model and Hurst' analysis, we calculate numerically the auto-correlation function, the pseudo standard deviation of displacement defined by ourselves and the rescaled range function and investigate systematically the statistical properties. The results are compared with that of one-dimensional random binary sequence. We show that the Fibonacci sequence presents correlated behavior as well as scaling invariability and self-similarity. In addition, basing on the tight-binding model of the single electron and transfer matrix method, we study the charge transfer properties of Fibonacci sequence and discuss specially the dependence of electron transmission on energy and the length of the sequence. We find some resonant peaks can survive in relatively longer Fibonacci sequences than in random sequences, which also implies that there are long-range correlations in Fibonacci sequences.

Keywords: Fibonacci sequence, statistical properties, electronic transfer coefficient

PACC: 7210B, 0250

* Project supported by the Natural Science Foundation of Hunan Province, China (Grant No. 08JJ3005), the Science Foundation for Postdoctor of China (Grant No. 20080431025), the Science Foundation for Postdoctor of Central South University, China (Grant No. 20071025) and the Foundation of Key Laboratory of Low Dimensional Quantum Structures and Quantum Control of Ministry of Education of Hunan Normal University, China (Grant No. QSQC0905).

† E-mail: xlliucs@ sina. com